Kirkuk University Journal /Scientific Studies (KUJSS)
Volume 12, Issue 3, June 2017
ISSN 1992 – 0849

Determination of the imaginary component of atomic scattering factor for x-ray for nickel element for the energy range of 8.048-19.609 KeV

Dr.Muhsin Hasan Ali

Department of physics, College of Education for Pure Sciences, Tikrit University

Abstract

In this paper x-ray mass attenuation coefficients of nickel were measured with precision between 0.2% and 0.5% for four characteristic wavelengths: copper and molybdenum K lines. The mass photoelectric absorption coefficients were determined by subtracting the calculated Rayleigh scattering from the total scattering and the values of measured attenuation coefficients. The values of the imaginary component of atomic scattering factor for x-ray in nickel were determined from the difference between the values of measured attenuation coefficients and theoretical calculations, it is shown that In the low energy at $\omega \ll \omega_e$, and the high energy at $\omega \gg \omega_e$, the imaginary component approximately is zero, and the electrons are so tightly bound to the atom. In the region $\omega \sim \omega_e$ where the imaginary component of the scattering is dominate and the electron become highly absorbing. There was good agreement between the values of the imaginary component of atomic scattering factor has been found and the values has been calculated by using various model.

Key Words:- atomic scattering factor, the imaginary component of atomic scattering factor, coherent scattering.

Kirkuk University Journal /Scientific Studies (KUJSS)
Volume 12, Issue 3, June 2017
ISSN 1992 – 0849

ايجاد المركبة الخيالية لعامل التشتت الذري للاشعة السينية لعنصر النيكل لمدى الطاقة من 8.048 الى 19.609 كيلو الكترون فولت

م.د.محسن حسن علي

قسم الفيزياء- كلية التربية للعلوم الصرفة-جامعة تكريت

E-mail:- mohsenastro@yahoo.com

الخلاصة

تم في هذا البحث قياس معامل التوهين الكتلي للاشعة السينية للنيكل بدقة تتراوح بين 0.5% -0.2% لاربع اطوال موجية مميزة لخطوط k بالنسبة للنحاس والموليبدنيوم، كما تم ايجاد معامل الامتصاص الكهروضوئي الكتلي من خلال طرح استطارة رايلي التي تم حسابها من الاستطارة الكلية، التي تم ايجادها من معامل التوهين الكتلي، ان قيم المركبة الخيالية لعامل التشتت الذري للاشعة السينية للنيكل تم ايجادها من خلال الفرق بين معاملات التوهين المقاسة والحسابات النظرية، اذ لوحظ عند الطاقات الواطئة $\omega \ll \omega_e$ ، وعند الطاقات العالية $\omega \gg \omega_e$ ، ان المركبة الخيالية تقريباً تساوي صفر، أي ان الالكترونات مرتبطة بشدة الى الذرة، بينما نلاحظ في المنطقة التي فيها $\omega \sim \omega_e$ فان المركبة الخيالية للاستطارة تكون بارزة والإلكترون يصبح ذات امتصاص عالي، كذلك تبين ان هنالك اتفاق جيد بين القيم التي تم التوصل اليها للمركبة الخيالية لعامل التشتت الذري مع القيم التي تم حسابها باستخدام نماذج مختلفة.

كلمات مفتاحية:- عامل التشتت الذري، الجزء الخيالي لعامل التشتت الذري، الاستطارة المتشاكهة.

Kirkuk University Journal /Scientific Studies (KUJSS)
Volume 12, Issue 3, June 2017
ISSN 1992 – 0849

١- المقدمة:- (Introduction)

تصف المركبة الحقيقة والخيالية للتشتت الشاذ لعامل التشتت الذري الكلي الخصائص البصرية للمواد، وهذا يتضمن حالات الانعكاس والانكسار والامتصاص للاشعة السينية، حيث ان التوزيع الفضائي للالكترونات الذرية يكون ذات اهمية بالنسبة لهذه الابحاث، كما في حالة الحيود وعامل التشتت الذري الكلي [1]، ان توهين الاشعة السينية بالمواد المختلفة يزودنا بطيف واسع من المعلومات حول الخصائص الاساسية للمادة على المستوى الذري والجزيئي وبشكل خاص تستخدم القياسات النسبية والمطلقة لمعامل التوهين الكتلي لقياس التنبؤات النظرية للامتصاص الكهروضوئي باستخدام دالات الموجة للالكترون ذات الحالة المحددة [2] ، علاوة على التحري عن داينميكية العمليات الذرية بضمنها عمليات انتقال أوجيه (Auger Transition) ، وتزودنا بمعلومات حول كثافة الحالات الالكترونية والاواصر الجزيئية وخواص الحالة الصلبة الأخرى [3] .

٢- الجانب النظري:- (Theoretical Part)

a - المركبة الخيالية لعامل التشتت الذري

ان الذرات عند تشتيتها للاشعة لا تحدث أي تغيير اضافي في زوايا الطور النسبية وفي العادة يكون هذا صحيحاً الا انه يوجد بعض الاستثناءات وذلك في حالة بعض الذرات التي تكون حافة الامتصاص لها بالقرب من تردد الاشعة الساقطة اذ انها تحدث تغيراً اضافياً في زوايا الطور، وهذا يسمى التشتت الشاذ، وحيث ان معامل التشتت يتم حسابه بافتراض ان الالكترونات في الذرة يمكن اعتبارها حرة وهذا الافتراض يجب ان يعدل في حالة التشتت الشاذ، اذ يجب الاخذ في الاعتبار تفاعل الاشعة الساقطة على الالكترونات المرتبطة بالنواة حيث ان هذا التفاعل هو الذي يحدث حافة الامتصاص، اذ ان معامل التشتت يصبح كمية مركبة " f+f '+f والجزء الخيالي " f هو الذي يهمنا حيث ان هذه المركبة هي التي تدخل التغير في الطور [4].

عند مرور حزمة من فوتونات الاشعة السينية احادية الطول الموجي خلال مادة متجانسة فان معامل التوهين وعملية ازالة فوتونات من الحزمة الساقطة بعدة آليات، يمكن تعريفه من خلال قانون بير- لمبرت [5]،

$$I = I_0 e^{-\mu x} \qquad (1)$$

Kirkuk University Journal /Scientific Studies (KUJSS)
Volume 12, Issue 3, June 2017
ISSN 1992 – 0849

حيث I_0 و I شدات حزمة الاشعة السينية الساقطة والنافذة على التوالي، x سمك المادة و μ معامل التوهين الخطي للمادة والذي يتناسب مع المقطع العرضي الكلي لتفاعل الفوتونات لكل ذرة σ_{TOT}،

$$\sigma_{TOT} = \mu(M/N_a\rho) \qquad (2)$$

حيث M الوزن الذري و N_a عدد افوكادرو و ρ كثافة المادة.

بالنسبة لطاقات فوتونات الاشعة السينية يعبر عن المقطع العرضي الكلي لتفاعل الفوتونات بـ

$$\sigma_{TOT} = \sigma_{Pe} + \sigma_R + \sigma_C \qquad (3)$$

حيث σ_{Pe} المقطع العرضي للامتصاص الكهروضوئي، σ_R استطارة رايلي، σ_C استطارة كومبتن.

ان تفاعل الاشعة السينية مع الذرات يمكن ان يوصف من خلال التقريب لعامل التشتت الذري f، باستثناء استطارة كومبتن، والذي يمكن كتابته بـ [6]،

$$f = f_0 + f' + f'' \qquad (4)$$

حيث f_0 عامل استطارة ثومسن وبالنسبة للاستطارة الامامية يساوي العدد الذري، ($f' + f''$) الجزء الحقيقي والخيالي لتصحيح التشتت والذي يعتمد بشدة على الطاقة قرب حافة الامتصاص، الجزء الخيالي (f'') يرتبط بالمقطع العرضي للامتصاص الكهروضوئي بالعلاقة التالية،

$$f'' = [\omega N_a\rho/4\pi r_e cM] \times \sigma_{Pe} \qquad (5)$$

حيث ω التردد الزاوي للفوتون، r_e نصف قطر الالكترون الكلاسيكي و c سرعة الضوء.

b - المقطع العرضي لاستطارة رايلي (الاستطارة المتشاكهة)

Kirkuk University Journal /Scientific Studies (KUJSS)
Volume 12, Issue 3, June 2017
ISSN 1992 – 0849

ان المعرفة الدقيقة لاستطارة رايلي للفوتونات من قبل الذرة المنفردة او الأيون خصوصاً بالقرب من حافة الامتصاص الكهروضوئي هي مفتاح للحصول على معلومات قيمة عن التركيب الداخلي للنظام المعقد، كما ان التنبؤات النظرية الدقيقة لاستطارة رايلي للفوتونات ذات اهمية كبيرة بسبب امكانية تطبيقها في مختلف المجالات بما فيها الكيمياء وعلوم الاحياء والحماية النووية والتشخيص الطبي [4].

في الاستطارة المتشاكهة يغير الفوتون اتجاهه فقط دون انتقال للطاقة الى الذرة الهدف التي تحتفظ بنفس الطاقة بعد الاستطارة بالالكترونات الذرية المقيدة حيث يعبر رياضياً عن المقطع العرضي التفاضلي للاستطارة المتشاكهة بالعلاقة التالية [7]،

$$\sigma_{Rayleigh} = \sigma_{Thomson} \times [F(k,z)]^2 \qquad (6)$$

حيث $\sigma_{Thomson}$ هو المقطع العرضي للالكترون الحر اوالمقطع العرضي لثومسن والذي يعطى بـ [8]،

$$\frac{d\sigma_{Thomson(\theta)}}{d\theta} = \frac{1}{2} r_e^2 (1 + cos^2\theta) \qquad (7)$$

حيث $d\theta$ زاوية الاستطارة و $\frac{d\sigma_{Thomson(\theta)}}{d\theta}$ هو المقطع العرضي التفاضلي لثومسن و ($r_e = 2.818\times10^{-13}$ cm)، و $F(k,z)$ عامل التشكل الذري و Z العدد الذري للعنصر، اذ يمكن كتابة المعادلة (6) بالصيغة التالية [7]،

$$\frac{d\sigma_{Rayleig}}{d\theta} = \frac{r_e^2}{2}(1 + cos^2\theta) \times [F(k,z)]^2 \qquad (8)$$

ان عامل التشكل الذري لشحنة الالكترونية ذات تماثل كروي حول النواة يعطى بـ [7]،

$$f(k,Z) = 4\pi \int_0^{\infty} \rho(r) \frac{\sin(kr)}{kr} r^2 dr \qquad (9)$$

Kirkuk University Journal /Scientific Studies (KUJSS)
Volume 12, Issue 3, June 2017
ISSN 1992 – 0849

حيث k منقول الزخم بوحدة $A^{0\,-1}$ و $k = \frac{\sin(\theta)}{\lambda}$ ، θ زاوية الاستطارة و λ الطول الموجي للفوتون الساقط و $\rho(r)$ كثافة الشحنة الالكترونية، r المسافة بين النواة والالكترون.

يهدف البحث الى ايجاد المركبة الخيالية العلمل التشتت الذري والذي من خلاله يمكن ايجاد الخصائص البصرية للمعادن.

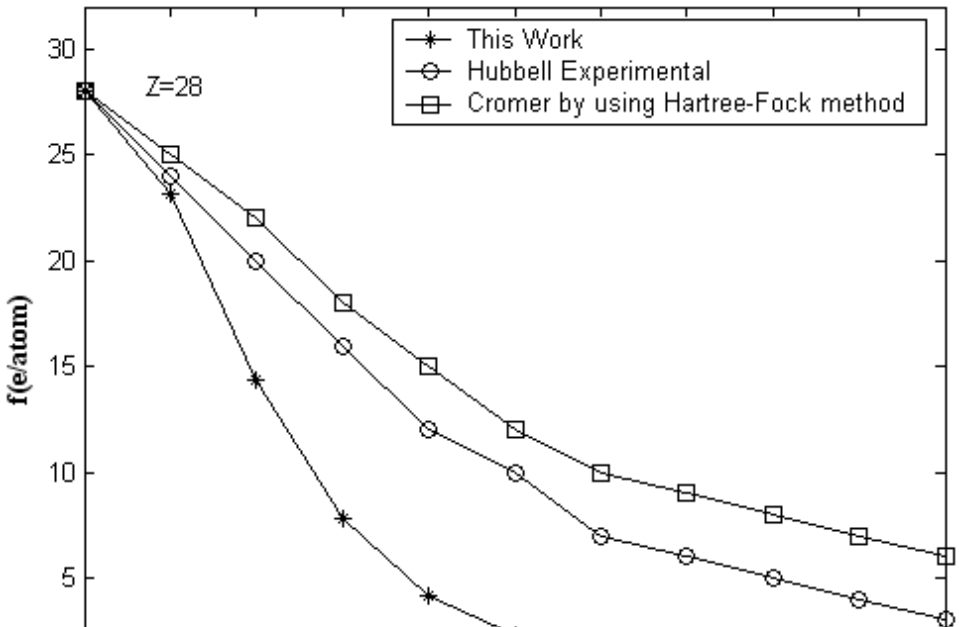
3 - الحسابات والنتائج:-

تم الحصول على قيم عامل التشكل الذري عن طريق المعادلة (9) في حالة تطبيقها على ذرة منفردة من خلال تقريب الجسيمات المستقلة حيث يتم تجاهل حدود التنافر بين الالكترونات [7]، ان الالكترونات حول النواة ليس لها مواضع محددة بل تنتشر على امتداد حجم الذرة، لذا يمكن اجراء التكامل في المعادلة (9) على الجزء الزاوي من عنصر الحجم، وباجراء عملية التكامل، وجد ان عامل التشكل الذري يعطى بالمعادلة،

$$f(k,Z) = \frac{Z}{(1+4\pi^2k^2a_0^2)^2} \qquad (10)$$

حيث a_o نصف قطر بوهر لذرة الهيدروجين.

لايجاد قيم عامل التشكل الذري تم اعتماد المعادلة (10) باستخدام برامج الـ MATLAB ولقيم $0 \le (\sin\theta)/\lambda \le 1A^{0\,-1}$، والشكل (1) يوضح العلاقة بين $(\sin\theta)/\lambda$ وعامل التشتت الذري .



Kirkuk University Journal /Scientific Studies (KUJSS)
Volume 12, Issue 3, June 2017
ISSN 1992 – 0849

الشكل (1) العلاقة بين $\sin\theta/\lambda$ وعامل التشتت الذري .

ومن خلال مقارنة النتائج التي تم التوصل اليها لعامل التشتت الذري مع ما توصل اليه Hubbell [9] وCromer باستخدام طريقة هارتر- فوك [10] والموضحة بالشكل (1)، نلاحظ هنالك سلوك متقارب لقيم عامل التشتت الذري الا ان الاختلافات بين القيم المحسوبة يعتمد على الاسلوب المتبع في ايجاد الدوال الموجية.

بينما تم اعتماد المعادلة (8) لايجاد قيم المقطع العرضي للاستطارة المتشاكهة، الجدول (1) يبين قيم المقطع العرضي للاستطارة المتشاكهة التي تم الحصول عليها، وتم اعتماد المعادلة (١) لايجاد معامل التوهين الكتلي μ/ρ للاشعة السينية في النيكل للسمك (1, 2, 3, 4, 5) mm عند الطاقات CuKα (8.048 KeV) وCuKβ (8.906 KeV) و MoKα (17.480 KeV) وMoKβ (19.609 KeV) ، والذي من خلاله تم ايجاد المقطع العرضي الكلي للاستطارة والموضح في الجدول (2)، من المعادلة (3) وعند استثناء استطارة كومبتن لانها استطارة غير متشاكهة، نجد ان المقطع العرضي للامتصاص الكهروضوئي يمثل الفرق بين المقطع العرضي العرضي الكلي للاستطارة و المقطع العرضي لاستطارة رايلي، وباستخدام المعادلة (5) تم ايجاد الجزء الخيالي لعامل التشتت الذري للاشعة السينية في النيكل، الجدول (3) يوضح قيم الجزء الخيالي لعامل التشتت الذري التي تم الحصول عليها. كما ان تغير الجزء الخيالي لعامل التشتت الذري مع طاقة الفوتون الساقط موضحة بالشكل (2).

الجدول (1) قيم عامل التشكل الذري والاستطارة المتشاكهة.

$\sin(\theta)/\lambda$	0.6490	0.7182	1.4097	1.5814

Kirkuk University Journal /Scientific Studies (KUJSS)
Volume 12, Issue 3, June 2017
ISSN 1992 – 0849

$A^{0\ -1}$				
f (e/atom)	١.٠٥٢٦	٠.٧٥٤٦	٠.٠٦٥٩	٠.٠٤٢٤
σ_R (barn/atom)	٠.٧٣٧١	٠.٣٧٨٨	٠.٠٠٢٨	٠.٠٠١١

الجدول (2) قيم طاقة الفوتون الساقط ومعامل التوهين الكتلي والمقطع العرضي الكلي للاستطارة.

E (KeV)	٨.٠٤٨	٨.٩٠٦	١٧.٤٨	١٩.٦٠٩
μ/ρ (cm^2/g)	٤٥.٧	٢٧٤.٣	٤٦.٥	٣٢.٢
μ/ρ ** (cm^2/g)	43.06	270	44.50	30.59
σ_{Total} (barn/atom)	٤٤٥٣.٩	٢٦٧٣٣	٤٥٣١.٨	٣١٣٨.٢

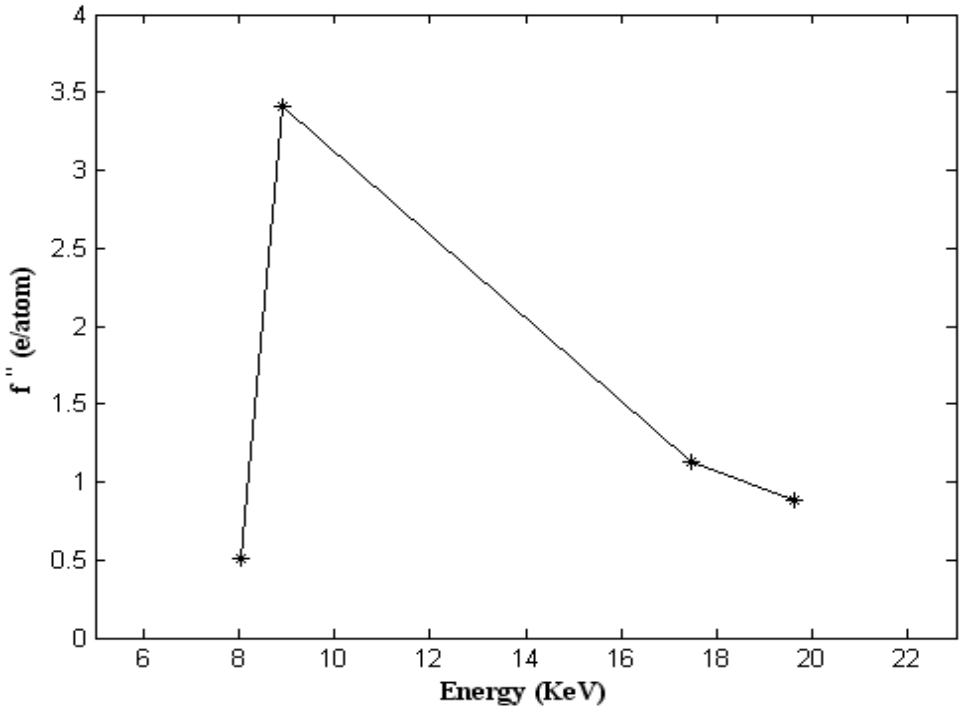
Kirkuk University Journal /Scientific Studies (KUJSS)
Volume 12, Issue 3, June 2017
ISSN 1992 – 0849

σ_{Total}** (barn/atom)	٤١٩٠	٢٦311	٤٣٣٦	2972

الجدول (3) قيم طاقة الفوتون الساقط والمقطع العرضي الكهروضوئي للاستطارة والجزء الخيالي لعامل التشتت الذري.

E (KeV)	٨.٠٤٨	٨.٩٠٦	١٧.٤٨	١٩.٦٠٩
σ_{Pe} (barn/atom)	٤٤٥٣.١	٢٦٧٣٣	٤٥٣١.٨	٣١٣٨.٢
f''(e/atom)	٠.٥١٢٥٨	٣.٤٠٤٦	١.١٣٢٨	٠.٨٧٩٩
f''(e/atom)**	٠.49	٣.١٠١	١.09	٠.٨٥

**- Chantler [11]



Kirkuk University Journal /Scientific Studies (KUJSS)
Volume 12, Issue 3, June 2017
ISSN 1992 – 0849

الشكل (2) العلاقة بين الجزء الخيالي لعامل التشتت الذري
مع طاقة الفوتون الساقط .

4 - الاستنتاجات والمناقشة:-

ان النتائج الحالية التي تم التوصل اليها لعامل التشتت الذري والموضحة في الشكل (1) تكون مفيدة بالنسبة للحسابات التي تصف القيم المحسوبة لذرة منفردة ومدى الانحراف عن القيم المتوقعة ، حيث ان الانحرافات تم ملاحظتها عند الطاقات العالية القريبة من حافة الامتصاص وهذا بسبب اختلاف التركيب الالكتروني للمادة بالمقارنة مع الذرة المنفردة والتي هي اساس التقريب النظري ، كذلك فان النتائج الحالية توضح اهمية قيم محددة للطاقة والتي يمكن ملاحظتها من الشكل (2) حيث نلاحظ انه عند الطاقات الواطئة عندما $\omega \ll \omega_e$ ، وكذلك عند الطاقات العالية عندما $\omega \gg \omega_e$ ، حيث ω طاقة الفوتون الساقط و ω_e طاقة ارتباط الالكترون بالذرة، ان المركبة الخيالية تقريباً تساوي صفر، أي ان الالكترونات مرتبطة بشدة الى الذرة، بينما نلاحظ في المنطقة التي فيها $\omega \sim \omega_e$ فان المركبة الخيالية للاستطارة تكون بارزة والالكترون يصبح ذات امتصاص عالي، لذلك فان قياس المركبة الخيالية لعامل التشتت الذري يكون اكثر فائدة للقياسات الدقيقة والتي من شأنها تحسين مدى فهمنا لهذه العمليات التي تعرف بالاستطارة الرنينية وهي اكثر ملائمة لوصف السلوك الرنيني بالقرب من حافات الامتصاص.

ان ما تم التوصل اليه من سلوك لقيم عامل التشتت الذري والمركبة الخيالية يتفق مع كل من [6-13].

من الممكن استخدام نظرية ميكانيك الكم والفيزياء الذرية لحساب قيم عامل التشتت الذري كدالة لطاقة الفوتون، حيث ان المركبة الخيالية لعامل التشتت الذري ترتبط ارتباط مباشر مع معامل الامتصاص الكهروضوئي والمقارنة بين القيم المحسوبة والمقاسة لمعاملات التوهين الكتلي للاشعة السينية التي يمكن ان توضح مدى فهمنا للأساليب النظرية [12]، ان تطوير التقنيات الحسابية مكننا من

ايجاد الحلول للدالة الموجية الذرية لمدى واسع من العناصر والطاقات، هذه الحسابات تباعا مكنت من حساب المقاطع العرضية للامتصاص الكهروضوئي، ان الجداول المستخدمة لعامل التشتت الذري تختلف بالحلول للعديد من العناصر ولمدى الطاقات الهامة، ان النماذج النظرية المطورة لا تعطي بضرورة اتفاق افضل مع القيم التجريبية ان الاختلافات الرئيسية بين النتائج ينتج من الأطر النظرية المختلفة التي استخدمت لحساب الدالة الموجية حيث ان كل منها يعالج التبادل والارتباط والتداخل الذي يحدث بطريقة مختلفة لذلك تنجم الاختلافات عن التطبيق المتنوع للطرق التقريبية ومعايير التقارب .[13]

المصادر:-

[1] Krishnananda, K.N.Niranjana, N.M.Badiger. **2013**. "Measurement of real and imaginary form Factor of silver atom using a high resolution HPGe detector", Journal of X-Ray Science and Tecgnology, vol 21, no. 4, pp. 557-565.

[2] M. Tauhidul Islam, Lachlan J. Tantau, Nicholas A. Rae, Zwi Barnea, Chanh Q. Tran and Christopher T. Chantler. **2014**. "Measurement of the X-ray mass attenuation coefficients of silver in the 5–20 keV range", J. Synchrotron Rad. 21, 413–423.

[3] B.S. Sidhu, A.S. Dhaliwal, K.S. Mann and K.S. Kahlon. **2012**. "Study of mass attenuation coefficients, effective atomic numbers and electron densities for some low Z compounds of dosimetry interest at

59.54 keV incident photon energy" Annals of Nuclear Energy, vol. 42, pp. 153–157.

[4] Muhammad, W. & Lee, S. H. **2013**. "Impact of anomalous effects on the angular distribution of coherently scattered photons using Monte Carlo simulation", Acta Cryst. A69, 297–308.

[5] Shivalinge Gowda . **2016**. " The Mass Attenuation coefficients, Effective Atomic Cross Sections, Effective atomic numbers and Electron densities for some Halides ", Physics and Mathematical Sciences Vol.10 (8).

[6] J.Baltazar-Rodrigues and C.Cuusatis. **2001**. "Determination of X-ray Photoelectric Absorption of Ge and Si Avoiding Solid-State Effects", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 179, 325-333.

[7] L. Safari, J. P. Santos, P. Amaro, K. Jankala and F. Fratini. **2014**. "Analytical evaluation of atomic form factors: application to Rayleigh scattering", Journal of Mathematical Physics , Vol.56(5).

[8] Rafea Abdullah Abbad Algoboory. **2012**. "Evaluation of the Compton (Incoherent) and Rayleigh (Coherent) Differential Cross Sections of Scattering for Rhodium 103 Rh 45 and Tantalum 181 Ta 73 by Employing CSC" , J. Baghdad for Sci. Vol.9(3), 554-558.

[9] J.H. Hubbell, Wm.J. Veigele, E.A. Briggs, R.T. Brown, D.T. Cromer, and R.J. Howerton, (1975) "Atomic form factors, incoherent scattering functions, and photon scattering cross sections", J. Phys. Chem. Ref. Data 4, 471-538.

[10] D. T. Cromer, A. C. Larson, and J. T. Waber, (1964) " Hartree scattering factors for elements 37 through 98". Acta Crystallogr. 17, 1044–50.

[11] C.T. Chantler, "Theoretical Form Factor, Attenuation, and Scattering Tabulation for Z=1–92 from E=1–10 eV to E=0.4–1.0 MeV", J. phys. Chem. Ref. vol 24, 1995, pp 71-82.

[12] M.D. de Jonge, D. Paterson, E.P. Kanter and M.A. Beno. **2007**. "Measurment of The X-ray Mass Attenuation Coefficient and Determination of The Imaginary Component of The Atomic Form Factor of Tin Over The Energy Range of 29-60 keV", Physical Review A. , Vol.75 , pp.1050-2947.

[13] Nicholas A. Rae, C.T. Chantler and Z. Barnea. **2010**. "X-ray mass attenuation coefficients and imaginary components of the atomic form factor of zinc over the energy range of 7.2–15.2 keV" Phys. Rev. A 81, 022904.